

**ANALISIS HUBUNGAN KUANTITATIF STRUKTUR
DAN NILAI KONSENTRASI MISEL KRITIK SURFAKTAN ANIONIK DENGAN
METODE SEMIEMPIRIS AM1**

**QUANTITATIVE ANALYSIS OF RELATIONSHIP STRUCTURE
AND ANIONIC SURFACTANT MICELLE CONCENTRATION CRITIC
WITH SEMIEMPIRIS AM1**

Eva Vaulina Yulistia Delsy^{1*}, Ponco Iswanto¹, Sandi Winaryo¹

¹Jurusan Kimia Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam
Universitas Jenderal Soedirman, Purwokerto Indonesia

*email : vaulinaeva@gmail.com

Received October 13, 2016; **Accepted** May 10, 2017; **Available online** May 30, 2017

ABSTRAK

Analisis hubungan kuantitatif struktur dan nilai Konsentrasi Misel Kritis (KMK) surfaktan anionik telah dilakukan. Penelitian ini dilakukan dengan tujuan menyusun persamaan matematika untuk menghitung konsentrasi misel kritis teoritis surfaktan anionik. Dalam penelitian dilakukan penggambaran setiap struktur molekul surfaktan anionik ke model senyawa tiga dimensi, dilanjutkan dengan mengoptimasi setiap model struktur surfaktan anionik dengan metode perhitungan *Austin Model 1*(AM1), serta perhitungan deskriptor untuk dianalisis statistik dengan *Multiple linear Regression* (MLR). Hasil perhitungan statistik menunjukkan bahwa untuk menghitung nilai konsentrasi misel kritis teoritis surfaktan anionik dapat menggunakan persamaan sebagai berikut: $\log KMK = 4,157+0,118qC1+7,698qC2+0,425\alpha-0,010\mu-0,129RD-0,138 \log P+0,021BM-0,034A_{vdw}$, dengan $n = 100$; $r = 0,927$; $r^2 = 0,860$; $SE = 0,352$; $F = 30,888$; $PRESS = 23,506$.

Kata kunci : KMK, semiempiris AM1, surfaktan anionik

ABSTRACT

This research determines the mathematical equation which calculate the Concentration Micelle Critic theoretical anionic surfactant. The research was conducted the depiction of each surfactant anionic three-dimensional compound models, followed by optimizing the model structure anionic surfactant by using AM1 calculation method. Furthermore the calculation of descriptors (QSPR method), then it was analyzed statistically using Multiple Linear Regression (MLR). The results of statistical calculations showed that to calculate the theoretical CMC anionic surfactant can use the QSPR equation: $\log CMC = 4.157+0.118qC1+7.698qC2+0.425\alpha-0.010\mu-0.129RD-0.138 \log P+0.021BM-0.034A_{vdw}$, $n = 100$; $r = 0.927$; $r^2 = 0.860$; $SE = 0.352$; $F = 30.888$; $PRESS = 23.506$

Keywords : CMC, semiempiris AM1, anionic surfactant

PENDAHULUAN

Surfaktan adalah senyawa kimia yang memiliki gugus hidrofilik dan gugus lipofilik sekaligus, sehingga dapat mempersatukan campuran yang terdiri dari minyak dan air. Penggolongan surfaktan dilakukan berdasarkan muatan gugus polarnya atau muatan yang terikat pada alkilnya, yaitu surfaktan non ionik (tidak bermuatan), surfaktan kationik (bermuatan positif), surfaktan anionik (bermuatan negatif) dan surfaktan amfoter yaitu ada muatan positif dan negatif sekaligus (Lu, *et al.*, 2014). Penggunaan surfaktan banyak ditemui pada kehidupan sehari-hari, dalam produk deterjen,

kosmetik, farmasi, tekstil dan makanan (Masyithah, 2010). Surfaktan dapat pula digunakan sebagai bahan pelarut (*solubilizing agent*), bahan pembasah (*wetting agent*) dan bahan pengemulsi (*emulsion agent*).

Penggunaan surfaktan yang beragam dan tersebar di berbagai bidang, mendorong para peneliti untuk mengembangkan penggunaan molekul surfaktan yang sudah ada, bahkan menemukan molekul surfaktan baru. Salah satu surfaktan yang banyak digunakan oleh masyarakat adalah jenis surfaktan anionik (Machfud, Agag, Ishida, Shaikh, Qutubuddin, 2013). Pengembangan dan penemuan molekul surfaktan anionik baru menjadi masalah yang menarik untuk

dipecahkan. Penelitian untuk memperoleh desain molekul surfaktan anionik baru perlu dilakukan karena akan memiliki dampak yang sangat besar, baik di bidang sains maupun ekonomi. Keuntungan dapat diperoleh untuk peneliti dan lembaga, serta Negara Indonesia secara umum.

Cara untuk memperoleh molekul baru umumnya terbagi menjadi dua, yaitu cara klasik dan modern. Cara klasik masih memiliki banyak kelemahan karena menggunakan intuisi peneliti dengan *trial and error*. Cara klasik dapat menimbulkan potensi pencemaran zat kimia kepada lingkungan karena ada senyawa surfaktan yang sudah disintesis tetapi tidak memenuhi kriteria kualitas yang diharapkan. Cara modern dilakukan dengan menggunakan teknologi komputer dan perangkat lunak yang ada di dalamnya. Cara modern ini dikenal dengan pendekatan kimia komputasi. Pendekatan kimia komputasi dapat mengarahkan penemuan molekul baru dengan lebih ramah lingkungan dibandingkan dengan cara klasik (*trial and error*). Penelitian yang diusulkan ini akan mengarah pada target menghasilkan desain molekul surfaktan anionik baru yang diprediksikan dapat digunakan sebagai bahan yang mampu menurunkan tegangan permukaan.

Secara spesifik, pendekatan kimia komputasi yang dilakukan untuk mendesain molekul baru adalah analisis *Quantitative Structure-Activity Relationship (QSAR)* (Iswanto *et al.*, 2011). Cara yang sama dapat dilakukan pula untuk mendesain surfaktan anionik baru, namun istilah *Activity* diganti dengan *Property*. Istilah *Activity* digunakan untuk parameter aktivitas biologi suatu molekul kimia, sedangkan *Property* untuk parameter fisik suatu molekul kimia. Pendekatan kimia komputasi analisis *Quantitative Structure-Property Relationship (QSPR)* telah dilakukan untuk mempelajari dan memprediksi suhu transisi gelas polimer-polimer vinilik. Kemampuan kimia komputasi dalam menghasilkan desain molekul baru tidak dapat lepas dari adanya data-data percobaan yang telah dilakukan oleh peneliti terdahulu. Data-data percobaan yang berupa data aktivitas biologi atau data sifat fisikokimia dari penelitian sebelumnya digunakan untuk membuat persamaan matematika. Selanjutnya, persamaan matematika digunakan untuk memprediksi aktivitas atau sifat fisikokimia molekul baru.

Desain molekul baru yang potensial dilanjutkan dengan tahap sintesis (Iswanto, Chasani, Vaulina, 2008). Bentuk persamaan matematika hasil analisis QSPR secara umum adalah:

$$X = A + (C1.P1) + (C2.P2) + \dots + (Cn.Pn) \dots\dots(1)$$

dengan X adalah sifat fisikokimia dan A merupakan tetapan. Pi adalah parameter yang dihitung untuk setiap molekul atau dikenal juga dengan istilah deskriptor dan Ci adalah koefisien parameter pada persamaan matematika hasil analisis QSPR. Komponen persamaan matematika (1) sebagian diperoleh dari data percobaan laboratorium yang telah dilakukan dan sebagian lainnya diperoleh dari perhitungan kimia komputasi (Jensen, 1999). Kebutuhan untuk mendesain molekul surfaktan anionik baru adalah:

1. Data fisikokimia yang penting bagi surfaktan, yaitu Konsentrasi Misel Kritis (KMK).
2. Tetapan, yang diperoleh dari perhitungan kimia komputasi.
3. Nilai (C1.P1), (C2.P2) dan seterusnya, diperoleh dari perhitungan kimia komputasi.

Konsentrasi Misel Kritis (KMK) adalah konsentrasi surfaktan dimana surfaktan tersebut membentuk misel secara spontan. Misel adalah gabungan molekul-molekul surfaktan yang membentuk agregat (Kondo & Yoshino, 2005). Surfaktan yang memiliki nilai KMK rendah, memiliki arti bahwa surfaktan tersebut mudah membentuk misel. Semakin rendah nilai KMK maka surfaktan digolongkan sebagai surfaktan yang memiliki aktivitas permukaan yang tinggi atau dikatakan memiliki kualitas yang baik (Kumar, Gupta, Kumar, 2011).

Penelitian yang memiliki tujuan memperoleh desain molekul surfaktan baru harus menggunakan nilai KMK sebagai sifat fisikokimia dalam pembuatan persamaan matematika prediksi hasil analisis QSPR. Pada saat ini belum ada persamaan matematika untuk perhitungan KMK teoritis bagi surfaktan anionik. Oleh karena itu, perlu dilakukan penyusunan persamaan QSPR untuk perhitungan KMK dengan menggunakan pendekatan kimia komputasi. Penelitian ini bertujuan menyusun persamaan matematika untuk menghitung KMK teoritis surfaktan anionik berdasarkan pendekatan kimia komputasi dengan menggunakan metode semiempiris AM1.

METODE PENELITIAN

Bahan dan Alat Penelitian

Penelitian yang dilakukan adalah kajian teoretik yang menggunakan data percobaan nilai Konsentrasi Misel Kritis (KMK) 100 molekul surfaktan anionik (Huibers, 1999). Data percobaan nilai KMK 100 molekul surfaktan anionik dapat dilihat pada **Tabel 1**. Bahan berikutnya adalah model struktur 3 dimensi untuk 100 molekul surfaktan anionik. Alat yang digunakan adalah satu unit komputer *Processor Core2Duo*, RAM 2 GB. Perangkat lunak yang dibutuhkan adalah *operating system windows*, *Hyperchem 8.0* untuk melakukan perhitungan kimia komputasi dan untuk analisis data hasil perhitungan digunakan *Statistical Product and Service Solution versi 13.0* (SPSS 13.0).

Prosedur Penelitian

Pemilihan Deskriptor

Penentuan deskriptor merupakan hal penting dalam pembuatan persamaan matematika hasil analisis QSPR. Deskriptor yang digunakan dalam penelitian ini yaitu muatan atom bagian polar dan bagian non polar molekul surfaktan, momen dwi kutub, bobot molekul, volume Van der Waals dan logaritma koefisien partisi. Tahap ini menghasilkan deskriptor-deskriptor yang siap untuk dihitung dengan perangkat lunak *Hyperchem* versi 8.

Optimasi Struktur dan QSAR Properties (Jensen, 1999).

Setiap senyawa yang digunakan dalam penelitian ini, dibuat model struktur dua dimensi. Setelah itu model dilengkapi atom hidrogen pada tiap-tiap atom, dan dibentuk menjadi struktur tiga dimensi (3D) dengan menu *Build (Add H and Model Build)*. Seluruh optimasi dan pengaturan dilakukan dengan pendekatan perhitungan kimia kuantum menggunakan program *HyperChem* versi 8.

Proses selanjutnya adalah melakukan optimasi geometri struktur, berupa minimasi energi molekul guna memperoleh konformasi molekul yang paling stabil. Perhitungan dilakukan dengan metode semiempiris AM1, batas konvergensi yang digunakan yaitu 0,001 kkal/Å.mol. Metode optimasi dilakukan berdasarkan algoritma Polak-Ribiere pada keadaan dasar (*ground state*). Setelah proses optimasi selesai, struktur dengan konformasi paling stabil disimpan dengan melakukan

start log, kemudian dilakukan perhitungan *single point*, dan *stop log* untuk mengakhiri proses perekaman hasil perhitungan. Data yang digunakan dalam penelitian ini yaitu muatan atom, momen dwikutub, bobot molekul, volume Van der Waals dan koefisien partisi n-oktanol/air atau dikenal dengan log P. Data muatan atom dan momen dwikutub tersimpan dalam *output* data hasil rekaman yang tersimpan dalam bentuk *file.log*. Data bobot molekul, volume Van der Waals dan log P dari tiap senyawa diperoleh dari QSAR properties pada fitur perangkat lunak *Hyperchem 8*. Tahap ini menghasilkan data kuantitatif deskriptor-deskriptor yang digunakan untuk menyusun persamaan matematika QSPR.

Penentuan Persamaan Matematika QSPR Terbaik (Jensen, 1999).

Persamaan matematika QSPR terpilih yang digunakan untuk menghitung nilai KMK prediksi desain surfaktan anionik baru, ditentukan berdasarkan analisa statistik kemometri dengan metode *Multiple Linear Regression* (MLR). Langkah ini dapat dilakukan dengan program SPSS versi 13. Analisis dilakukan terhadap deskriptor dari 100 molekul surfaktan anionik yang sudah ada (Huibers, 1999).

Nilai KMK hasil eksperimen dalam bentuk Log KMK (**Tabel 1**) dijadikan sebagai variabel tak bebas, dan seluruh deskriptor dijadikan sebagai variabel bebas. Persamaan matematika yang diperoleh divalidasi dengan 70 data KMK percobaan. Persamaan matematika QSPR terbaik adalah persamaan yang menghasilkan nilai jumlah total prediksi kuadrat yang paling kecil. Tahap ini menghasilkan persamaan matematika QSPR terbaik untuk mendesain molekul surfaktan anionik baru.

HASIL DAN PEMBAHASAN

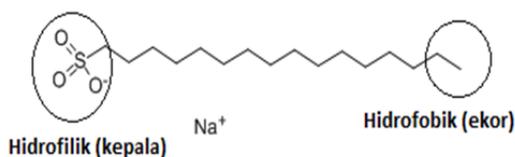
Deskriptor Teoretik Surfaktan Golongan Sulfonat

Penelitian ini menggunakan surfaktan anionik klasik termasuk linier dan bercabang, yaitu *alkanesulfonates*, *alkylbenzene-sulfonates*, *hydroxyalkanesulfo-nates*, dan *dialkyl sulfosuccinates*, dalam total 100 senyawa surfaktan anionik golongan sulfonat (Zoller, 1999).

Tabel 1. Senyawa Surfaktan Anionik dan Nilai Eksperimen log KMK pada suhu 25 °C (Huibers, 1999).

No	Rumus senyawa	log KMK	No	Rumus senyawa	Log KMK
1	C ₁₀ PhSO ₃ Na	-2,509	51	C ₆ C(C ₅)PhSO ₃ Na	-2,585
2	C ₁₂ PhSO ₃ Na	-2,921	52	C ₁₁ C(C)PhSO ₃ Na	-3,208
3	C ₈ C(C ₂)PhSO ₃ Na	-2,500	53	C ₁₃ C(C)PhSO ₃ Na	-3,577
4	C ₇ C(C ₃)PhSO ₃ Na	-2,400	54	C ₉ C(OH)C ₂ SO ₃ Na	-1,606
5	C ₆ C(C ₄)PhSO ₃ Na	-2,300	55	C ₉ C(OC)C ₂ SO ₃ Na	-2,118
6	C ₅ C(C ₅)PhSO ₃ Na	2,250	56	C ₉ C(OC ₂)C ₂ SO ₃ Na	-2,301
7	C ₇ C(C ₄)PhSO ₃ Na	-2,570	57	C ₉ C(OC ₃)C ₂ SO ₃ Na	-2,420
8	C ₁₀ C(C ₂)PhSO ₃ Na	-3,000	58	C ₉ C(OC(C)C)C ₂ SO ₃ Na	-2,458
9	C ₉ C(C ₃)PhSO ₃ Na	-2,900	59	C ₉ C(OC ₄)C ₂ SO ₃ Na	-2,817
10	C ₈ C(C ₄)PhSO ₃ Na	-2,780	60	C ₉ C(OC ₆)C ₂ SO ₃ Na	-3,185
11	C ₇ C(C ₅)PhSO ₃ Na	-2,700	61	C ₉ C(OC ₈)C ₂ SO ₃ Na	-3,922
12	C ₆ C(C ₆)PhSO ₃ Na	-2,600	62	C ₉ C(OCC(C ₂)C ₄)C ₂ SO ₃ Na	-3,501
13	C ₆ C(C ₆)PhSO ₃ Na	-2,600	63	C ₉ C(OPh)C ₂ SO ₃ Na	-2,708
14	C ₁₂ C(C)PhSO ₃ Na	-3,390	64	C ₉ C(O)C ₂ SO ₃ Na	-1,541
15	C ₁₁ C(C ₂)PhSO ₃ Na	-3,280	65	C ₁₁ C(OH)C ₂ SO ₃ Na	-2,199
16	C ₁₀ C(C ₃)PhSO ₃ Na	-3,150	66	C ₁₁ C(OC ₂ OH)C ₂ SO ₃ Na	-3,445
17	C ₉ C(C ₄)PhSO ₃ Na	-3,050	67	C ₁₁ C(EO ₂)C ₂ SO ₃ Na	-2,922
18	C ₈ C(C ₅)PhSO ₃ Na	-2,900	68	C ₁₁ C(OPh)C ₂ SO ₃ Na	-3,641
19	C ₇ C(C ₆)PhSO ₃ Na	-2,800	69	C ₁₁ C(OphC ₁₃)C ₂ SO ₃ Na	-4,787
20	C ₈ CO ₂ C ₂ SO ₃ Na	-1,312	70	C ₁₁ C(NC ₂)C ₂ SO ₃ Na	-2,964
21	C ₁₀ CO ₂ C ₂ SO ₃ Na	-1,883	71	C ₁₁ C(NC ₃)C ₂ SO ₃ Na	-3,200
22	C ₁₂ CO ₂ C ₂ SO ₃ Na	-2,523	72	C ₁₁ C(NC ₄)C ₂ SO ₃ Na	-3,708
23	C ₆ SO ₃ Na	-0,496	73	C ₁₁ C(O)C ₂ SO ₃ Na	-2,174
24	C ₈ SO ₃ Na	-0,796	74	C ₁₃ C(OH)C ₂ SO ₃ Na	-2,839
25	C ₁₀ SO ₃ Na	-1,398	75	C ₁₃ C(OC)C ₂ SO ₃ Na	-3,472
26	C ₁₂ SO ₃ Na	-1,959	76	C ₁₃ C(OC ₃)C ₂ SO ₃ Na	-4,089
27	C ₁₃ SO ₃ Na	-2,421	77	C ₁₃ C(OC ₄)C ₂ SO ₃ Na	-4,458
28	C ₁₄ SO ₃ Na	-2,602	78	C ₁₃ C(O)C ₂ SO ₃ Na	-2,735
29	C ₁₅ SO ₃ Na	-3,139	79	C ₁₅ C(OH)C ₂ SO ₃ Na	-3,420
30	C ₁₆ SO ₃ Na	-3,131	80	C ₁₀ EOSO ₃ Na	-1,787
31	C ₁₇ SO ₃ Na	-3,635	81	C ₁₀ C(C(OH))SO ₃ Na	-1,787
32	C ₁₀ C=C SO ₃ Na	-1,886	82	C ₁₂ C(C(OH))SO ₃ Na	-2,432
33	C ₁₂ C=C SO ₃ Na	-2,569	83	C ₆ CO ₂ CSO ₃ Na	-0,733
34	C ₁₄ C=C SO ₃ Na	-3,215	84	C ₈ CO ₂ CSO ₃ Na	-1,144
35	C ₁₆ C=C SO ₃ Na	-3,745	85	C ₁₀ CO ₂ CSO ₃ Na	-1,621
36	C ₁₀ C(C)SO ₃ Na	-1,827	86	C ₁₄ CO ₂ C ₂ SO ₃ Na	-3,046
37	C ₉ C(C ₂)SO ₃ Na	-1,730	87	C ₁₀ C(CO ₂ C)SO ₃ Na	-1,986
38	C ₈ C(C ₃)SO ₃ Na	-1,635	88	C ₁₂ C(CO ₂ C)SO ₃ Na	-2,583
39	C ₇ C(C ₄)SO ₃ Na	-1,548	89	C ₁₄ C(CO ₂ C)SO ₃ Na	-3,398
40	C ₆ C(C ₅)SO ₃ Na	1,442	90	C ₁₄ C(CO ₂ C ₂)SO ₃ Na	-3,509
41	C ₇ C(C ₇)SO ₃ Na	-2,144	91	C ₁₄ C(CO ₂ C ₃)SO ₃ Na	-3,964
42	C ₇ PhSO ₃ Na	-1,582	92	C ₁₆ C(CO ₂ C)SO ₃ Na	-4,000
43	C ₈ PhSO ₃ Na	-1,907	93	C ₁₆ C(CO ₂ C ₂)SO ₃ Na	-4,106
44	C ₆ C(C ₂)PhSO ₃ Na	-1,967	94	C ₁₆ C(CO ₂ C ₃)SO ₃ Na	-4,899
45	C ₈ C(C)PhSO ₃ Na	-2,303	95	C ₁₆ C(CO ₂ C(C)C)SO ₃ Na	-4,569
46	C ₇ C(C ₂)PhSO ₃ Na	-2,200	96	C ₄ C(C ₂)CCO ₂ CC(SO ₃ Na	-2,566
47	C ₅ C(C ₄)PhSO ₃ Na	-2,047	97	C ₄ CO ₂ C(SO ₃ Na)CCO ₂ C ₄	-0,663
48	C ₉ C(C)PhSO ₃ Na	-2,721	98	C ₅ CO ₂ C(SO ₃ Na)CCO ₂ C ₅	-1,239
49	C ₁₀ C(C)PhSO ₃ Na	-2,692	99	C ₆ CO ₂ C(SO ₃ Na)CCO ₂ C ₆	-1,817
50	C ₉ C(C ₂)PhSO ₃ Na	-2,606	100	C ₈ CO ₂ C(SO ₃ Na)CCO ₂ C ₈	-3,131

Surfaktan anionik yaitu surfaktan yang bagian alkilnya terikat pada suatu anion. Sifat hidrofiliknya berasal dari bagian kepala ionik yang biasanya merupakan gugus sulfat atau sulfonat. Pada kasus ini, gugus hidrofob diikat ke bagian hidofil dengan ikatan C-S-O yang labil, yang mudah dihidrolisis (Badr, 2014). Penelitian ini menggunakan surfaktan anionik dengan gugus sulfonat (SO_3^-) berada pada bagian kepala. **Gambar 1** adalah salah satu contoh surfaktan anionik golongan sulfonat.



Gambar 1. Struktur natrium 1-heksadekana sulfonat (Fessenden & Fessenden, 1986)

Perhitungan Deskriptor QSPR

Penelitian ini menggunakan tiga jenis deskriptor yang terdiri dari elektronik, hidrofobik, dan sterik. Deskriptor elektronik berupa muatan bersih atom C(polar) dan C(non-polar) pada surfaktan anionik, polarisabilitas, dan momen dwikutub, deskriptor hidrofobik berupa log P, serta deskriptor sterik terdiri dari indeks refraksi, luas permukaan Van der Waals, volume Van der Waals dan berat molekul, sehingga total deskriptor yang digunakan adalah 9 deskriptor.

Data muatan bersih atom untuk senyawa surfaktan anionik dihitung dengan optimasi geometri menggunakan AM1. Data muatan bersih atom menunjukkan perubahan yang signifikan pada senyawa surfaktan anionik *3-Alkyloxy-3-oxopropane-1-sulfonates, sodium salt*, oleh karena itu substitusi gugus yang berbeda akan mempengaruhi muatan bersih atom-atom tempat substituen itu berada. Perbedaan struktur molekul akan mengakibatkan perbedaan sifat elektronik (muatan bersih atom), sehingga menghasilkan aktivitas atau sifat fisik yang berbeda (Rode, Hofer, Kugler, 2007).

Deskriptor elektronik yang lainnya yaitu momen dwikutub dan polarisabilitas. Momen dwikutub dalam kaitannya dengan struktur surfaktan untuk melihat tingkat kepolaran senyawa surfaktan tersebut. Struktur yang meruah dengan banyaknya keragaman jenis atom yang menyusunnya akan menyebabkan nilai momen dwikutub

semakin besar (Baczko, Larpent, Lesot, 2004). Nilai momen dwikutub menunjukkan bahwa senyawa $\text{C}_8\text{C}(\text{C}_4)\text{PhSO}_3\text{Na}$ mempunyai momen dwikutub yang paling besar dibandingkan dengan senyawa surfaktan anionik yang lainnya, yaitu 14,74 Debye. Hal ini terjadi karena keragaman jenis atom pada senyawa $\text{C}_8\text{C}(\text{C}_4)\text{PhSO}_3\text{Na}$ yang cukup besar, yaitu adanya atom yang bersifat penarik elektron dan adanya atom yang bersifat sebagai pemberi elektron. Nilai momen dwikutub terkecil pada struktur senyawa $\text{C}_{11}\text{C}(\text{EO}_2)\text{C}_2\text{SO}_3\text{Na}$ menunjukkan nilai yang terkecil yaitu 5,084 Debye yang dikarenakan gugus-gugus yang membentuknya hampir sama, sehingga tarikan masing-masing atom hampir saling meniadakan. Hal ini sesuai dengan Alberty (1983) yang menyatakan bahwa momen dwikutub bermanfaat dalam memberikan informasi mengenai kesimetrisan molekul.

Deskriptor elektronik yang ketiga berupa polarisabilitas. Polarabilitas menggambarkan kemudahan suatu molekul untuk membentuk dipol sesaat atau untuk menginduksi (mengimbas) suatu dipol. Polarabilitas ini berkaitan dengan massa molekul relatif (M_r) dan bentuk molekul. Pada umumnya, makin banyak jumlah elektron, makin mudah mengalami polarisasi, karena jumlah elektron berkaitan dengan M_r , maka semakin besar M_r , semakin kuat gaya London (Tanaka, Nakamura, Nakanishi, Fujivara, 1994). Nilai polarabilitas menunjukkan bahwa senyawa $\text{C}_{11}\text{C}(\text{OPhC}_{13})\text{C}_2\text{SO}_3\text{Na}$ mempunyai polarabilitas paling besar dibandingkan senyawa surfaktan yang lainnya yaitu 62,19 Å. Hal ini terjadi karena $\text{C}_{11}\text{C}(\text{OPhC}_{13})\text{C}_2\text{SO}_3\text{Na}$ mempunyai M_r yang lebih besar dibandingkan yang lainnya. Nilai polarabilitas terkecil pada struktur senyawa $\text{C}_6\text{SO}_3\text{Na}$ yaitu 13,36 Å. Hal ini terjadi molekul dengan struktur panjang mempunyai kemungkinan lebih besar untuk mengalami dipol sesaat atau lebih mudah mengalami polarisabilitas, hal ini karena molekul dengan struktur panjang mempunyai bidang yang lebih luas bila dibandingkan dengan molekul yang memiliki struktur lebih rapat dan kecil (Wei, 2009).

Nilai log P memperlihatkan senyawa surfaktan anionik berkisar antara 1,43 sampai 9,70. Nilai log P merupakan standar kuantitas untuk menentukan sifat hidrofobik/hidrofilik suatu molekul. Semakin positif nilai log P

senyawa akan cenderung berada pada pelarut non-polar daripada pelarut polar, sedangkan semakin negatif nilai log P senyawa akan cenderung berada pada pelarut polar daripada pelarut non-polar (Zargatalebi, Barati, Kharrat, 2014). Senyawa dengan nilai log P terbesar yaitu sebesar 9,70 adalah senyawa $C_{11}C(OPhC_{13})C_2SO_3Na$ dan nilai log P terkecil yaitu senyawa $C_6CO_2CSO_3Na$ sebesar 1,43, hal ini berarti bahwa senyawa $C_{11}C(OPhC_{13})C_2SO_3Na$ merupakan surfaktan anionik dengan kecenderungan berada pada fase non-polar paling tinggi, sedangkan senyawa $C_6CO_2CSO_3Na$ merupakan surfaktan anionik dengan kecenderungan berada pada fase non-polar paling rendah.

Deskriptor sterik yang digunakan dalam penelitian ini adalah indeks refraksi, luas permukaan Van der Waals, volume Van der Waals dan berat molekul. Nilai indeks refraksi surfaktan anionik berkisar antara 38,76 sampai dengan 108,92. Nilai indeks refraksi terbesar sebesar 108,92 adalah senyawa $C_{13}C(C)PhSO_3Na$, sedangkan nilai indeks refraksi terkecil yaitu senyawa C_6SO_3Na sebesar 38,76. Indeks refraksi (indeks bias) merupakan sifat fisik yang sangat sensitif. Kecuali jika komponen sangat murni, hampir tidak mungkin untuk mendapatkan indeks bias seperti yang tercantum pada literatur. Semakin dekat indeks bias yang teramati dengan indeks bias yang tercantum pada literatur, semakin murni senyawa tersebut. Indeks bias adalah fungsi dari kepolaran atom dan gugus dalam molekul, dalam hal struktur. Semakin polar suatu molekul, maka indeks biasanya akan semakin tinggi (Zargatalebi *et al.*, 2014).

Deskriptor sterik yang lainnya yaitu luas permukaan Van der Waals, volume Van der Waals, dan berat molekul. Nilai luas permukaan Van der Waal berkisar antara 215,81 Å² sampai dengan 740,42 Å². Nilai luas permukaan terbesar sebesar 740,42 Å² adalah senyawa $C_{11}C(OPhC_{13})C_2SO_3Na$, sedangkan nilai luas permukaan terkecil adalah senyawa C_6SO_3Na sebesar 215,81 Å². Semakin luas permukaan adsorben, maka semakin cepat efektif kemampuan menyerap zat-zat impuritis sehingga larutan menjadi lebih murni dan cenderung lebih bersih dari zat-zat impuritis atau zat-zat pengotor tersebut.

Deskriptor sterik yang ketiga berupa volume Van der Waals. Nilai volume Van der Waals berkisar antara 149,61 Å³ sampai 586,73 Å³. Nilai volume Van der Waals terkecil sebesar 149,61 Å³ adalah senyawa C_6SO_3Na , sedangkan nilai volume Van der Waals terbesar adalah senyawa $C_{11}C(OPhC_{13})C_2SO_3Na$ sebesar 586,73 Å³.

Deskriptor sterik yang keempat adalah berat molekul. Nilai berat molekul terbesar yaitu 574,88 s.m.a adalah senyawa $C_{11}C(OPhC_{13})C_2SO_3Na$, sedangkan nilai berat molekul terkecil pada senyawa surfaktan anionik adalah senyawa C_6SO_3Na sebesar 188,22 s.m.a. Data hasil perhitungan deskriptor untuk beberapa senyawa surfaktan anionik yang memiliki nilai-nilai perhitungan terbesar dan terkecil ditunjukkan dengan angka-angka yang dicetak tebal, dapat dilihat pada **Tabel 2**.

Analisis Multiple Linear Regression (MLR)

Seluruh data deskriptor hasil perhitungan digunakan untuk analisis MLR. Analisis statistik MLR pada penelitian ini dilakukan dengan metode backward pada data *fitting*. Analisis dilakukan dengan 70 data *fitting* dan 30 data uji. Penetapan *fitting* dan senyawa uji memakai teknik pemilihan acak. Hasil perhitungan *Statistical Product and Service Solution*(SPSS), memperoleh 6 model persamaan QSPR dengan parameter-parameter siap diuji. Kriteria persamaan terbaik yang dianjurkan dalam metode QSPR adalah harga koefisien korelasi (r) harus lebih besar dari 0,80 dan harga Fhitung yang didapat harus melebihi harga Ftabel (Fhitung/Ftabel > 1) untuk tingkat kepercayaan 95%. Model persamaan QSPR terbaik hasil metode backward selanjutnya digunakan untuk mencari persamaan akhir QSPR.

Penentuan persamaan akhir QSPR diperoleh dengan memasukkan variabel-variabel yang terlibat dalam persamaan terbaik (model 1). Variabel yang terlibat dalam model 1 yaitu qC1, qC2, α (polarisabilitas), μ (momen dwikutub), RD (indeks refraksi/indeks bias), log P, BM (berat molekul), Model persamaan QSPR hasil analisis *Multiple Linear Regression* (MLR) metode backward ditunjukkan pada **Tabel 3**.

Tabel 2. Data hasil perhitungan deskriptor untuk beberapa surfaktan anionik

Surfaktan	qC ₁ (polar)	qC ₂ (non polar)	α	μ	R _d	Log P	BM	V _{vdw}	A _{vdw}	Log KMK eks
C ₈ C(C ₄)PhSO ₃ Na	-0,69	-0,21	35,67	14,74	100,57	4,76	360,49	337,76	432,91	-2,78
C ₆ SO ₃ Na	-0,86	-0,21	13,36	13,36	38,76	1,86	188,22	149,61	215,81	-0,49
C ₁₃ C(C)PhSO ₃ Na	-0,69	-0,21	39,53	13,53	108,92	5,99	390,56	375,93	479,75	-3,57
C ₈ C(C ₂)PhSO ₃ Na	-0,69	-0,21	32,19	13,66	90,51	4,40	334,45	308,62	395,91	-2,50
C ₁₁ C(EO ₂)C ₂ SO ₃ Na	-0,86	-0,21	32,43	5,08	86,35	4,05	358,47	327,04	439,48	-2,92
C ₁₁ C(OphC ₁₃)C ₂ SO ₃ Na	0,08	-0,21	62,19	10,06	165,76	9,70	574,88	586,73	740,42	-4,78
C ₆ CO ₂ CSO ₃ Na	-0,01	-0,211	17,75	5,932	49,62	1,43	246,25	192,07	274,84	-0,73

Tabel 3. Model persamaan QSPR hasil analisis Multiple Linear Regression metode backward.

Model	Variabel	r	r ²	SE	F _{hitung} /F _{tabel}
1	qC ₁ , qC ₂ , R _d , Log P, Polarisabilitas, V _{vdw} , momen dwikutub, BM, A _{vdw}	0,915	0,838	0,379701	16,88301
2	qC ₁ , qC ₂ , R _d , Log P, Polarisabilitas, momen dwikutub, BM, A _{vdw}	0,915	0,838	0,376630	18,80354
3	qC ₁ , R _d , Log P, Polarisabilitas, momen dwikutub, BM, A _{vdw}	0,915	0,837	0,374395	21,05478
4	qC ₁ , Log P, momen dwikutub, BM, A _{vdw} , Polarisabilitas	0,914	0,835	0,373300	23,72543
5	qC ₁ , Log P, momen dwikutub, BM, A _{vdw}	0,914	0,835	0,370400	27,54463
6	qC ₁ , momen dwikutub, BM, A _{vdw}	0,913	0,833	0,370225	32,24819

Hasil MLR memberikan hasil yang cukup baik dengan nilai koefisien korelasi sebesar 0,92. Hasil ini juga didukung oleh nilai SE yang kecil, yaitu 0,352, nilai rasio F_{hitung}/F_{tabel} yang cukup besar yaitu 30,888, serta hasil perhitungan nilai PRESS sebesar 23,50. Perhitungan metode enter memperoleh persamaan akhir QSPR sebagai berikut :

$$\log \text{KMK} = 4,157 + 0,118qC_1 + 7,698qC_2 + 0,425\alpha - 0,01\mu - 0,129RD - 0,138 \log P + 0,021BM - 0,034A_{vdw}, \text{ dengan } n = 100 \quad r = 0,927 \quad r^2 = 0,860 \quad SE = 0,352 \quad F_{hitung}/F_{tabel} = 30,888 \text{ dan } PRESS = 23,506.$$

KESIMPULAN

Berdasarkan hasil yang diperoleh dapat disimpulkan bahwa untuk menghitung KMK teoritis surfaktan anionik dapat menggunakan persamaan akhir QSPR sebagai berikut :

$$\log \text{KMK} = 4,157 + 0,118qC_1 + 7,698qC_2 + 0,425\alpha - 0,01\mu - 0,129RD - 0,138 \log P + 0,021BM - 0,034A_{vdw}, \text{ dengan } n = 100 \quad r = 0,927 \quad r^2 = 0,860 \quad SE = 0,352 \quad F_{hitung}/F_{tabel} = 30,888 \text{ dan } PRESS = 23,506.$$

DAFTAR PUSTAKA

- Alberty, A. R. (1983). *Physical Chemistry*. New York ; NY: Jhon Wiley and Sons Inc.
- Badr, E. A. (2014). Inhibition effect of synthesized cationic surfactant on the corrosion of carbon steel in 1 M HCl, *Journal Industrial and Engineering Chemistry.*, 20(5): 3361-3366.
- Baczko, K., Larpent, C., Lesot, P. (2004). *New Amini Acid-Based Anionic Surfactant and Their Use As Enantiodiscriminating Lyotropic Liquid Crystalline NMR Solvents*, Tetrahedron, Asymmetry.
- Fessenden, R.J&J.S.Fessenden. (1986). *Kimia Organik* Jilid I, Penerbit Erlangga, Jakarta.
- Huibers, P. D. T. (1999). *Quantum-Chemical Calculations of the Charge Distribution in Ionic Surfactants*. Langmuir.
- Iswanto. P., Chasani, M. dan Vaulina, E.(2008). Sintesis Senyawa Turunan Kalanon sebagai Zat Antileukemia

- dengan Pendekatan QSAR (Quantitative Structure-Activity Relationship), Laporan Penelitian, Lembaga Penelitian UNSOED.
- Iswanto, P., Chasani, M., Delsy, E. V. Y., Harjono, Tahir, I., Hanafi, M. (2011) Novel Design of Calanone Derivatives as Anti-Leukemia Compounds based on Quantitative Structure-Activity Relationship Analysis, *Indonesian Journal of Chemistry.*, 11(1).
- Jensen, F. (1999). *Introduction to Computational Chemistry*. England; Wiley Chichester.
- Kondo, Y., Yoshino, N. (2005), Hybrid Fluorocarbon/Hydrocarbon Surfactant, *Journal Colloid Interface Science*. 10, 88-93.
- Kumar, A., Gupta, M. K., Kumar, M. (2011). An efficient non-ionic surfactant catalyzed multicomponent synthesis of novel benzylamino coumarin derivative via Mannich type reaction in aqueous media, *Tetrahed Letters*. 52(35): 4521-4525.
- Lu, J., Liyanage, P. J., Solairaj, S., Adkins, S., Arachchilage, G. P., Kim, D. H., Britton, C., Weerasooriya, U., Pope, G. A. (2014). New surfactant developments for chemical enhanced oil recovery, *Journal Petroleum Science English.*, 120: 94-101.
- Mahfud, R., Agag, T., Ishida, H., Shaikh, S., Qutubuddin, S. (2013). Synthesis and evaluation of novel anionic polymeric surfactants based on polybenzoxazines, *Journal Colloid Interface Science.*, 407: 339-347.
- Masyithah, Z. (2010) Optimasi Sintesis Surfaktan Alkanolamida dari Asam Laurat dengan Dietanolamina dan n-Metil Glukamina secara Enzimatik, *Disertasi*, Universitas Sumatera Utara.
- Rode, B.M., Hofer, T.S., Kugler, M.D. (2007). *The Basic of Theoretical and Computational Chemistry*. Weinheim; Wiley-VCH Verlag GmbH & Co., KGaA.
- Tanaka, A., Nakamura, K., Nakanishi, I., Fujivara, H. (1994). A Novel and Useful Descriptor for Hydrophobicity, Partition Coefficient Micellar-Water, and Its Application to a QSAR Study of Antiplatelet agents, *Journal Medicinal Chemistry* 37, 4563-4566.
- Wei, J.J., Kawaguchi, Y., Li, F.C., Zakin, J. L., Hart, D.J., Zhang, Y. (2009). Drag reducing and heat transfer characteristics of a novel zwitterionic surfactant solution, *International Journal Heat Mass Transfer.*, 52(15-16): 3547-3554.
- Zargartalebi, M., Barati, N., Kharrat, R. (2014). Influences of hydrophilic and hydrophobic silica nanoparticles on anionic surfactant properties: Interfacial and adsorption behaviors, *Journal Petroleum Science English.*, 119: 36-43.
- Zoller, U. (1999). *Handbook of Detergents Part A: Properties, Broze, G., Schick, M. J., Hubbard, A., Eds.*; Marcel Dekker, New York.